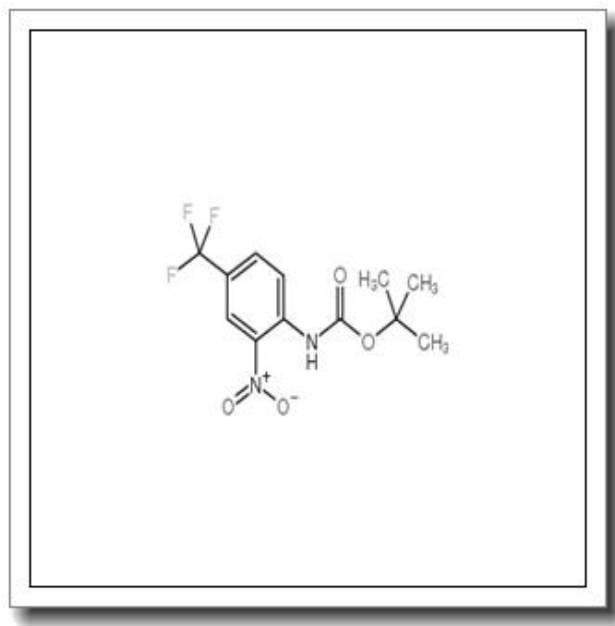


4-(三氟甲基)苯基氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl 2-nitro-4-(trifluoromethyl)phenylcarbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 2-nitro-4-(trifluoromethyl)phenylcarbamate
中文名称	4-(三氟甲基)苯基氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	141940-37-6
分子式	C ₁₂ H ₁₃ F ₃ N ₂ O ₄
分子量	306.238
纯度	≥96%

产品说明

4-(三氟甲基)苯基氨基甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(三氟甲基)苯基氨基甲酸叔丁酯 (化学名称: tert-butyl 2-nitro-4-(trifluoromethyl)phenylcarbamate) 是一种含氟有机化合物, CAS 号为 141940-37-6, 分子式为 $C_{12}H_{13}F_3N_2O_4$, 分子量为 306.238。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中的三氟甲基 (-CF₃) 和硝基 (-NO₂) 官能团赋予其独特的电子效应和疏水性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为氨基甲酸酯类衍生物, 该化合物在生物化学领域具有重要作用。其结构中的叔丁酯基团可提供保护基功能, 在肽类合成或药物中间体制备中防止氨基的副反应。三氟甲基的引入增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物设计 (如酶抑制剂开发) 和农用化学品合成中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体、农药活性成分合成及材料科学领域。具体用途包括: 1) 作为抗肿瘤或抗炎药物研发的关键片段; 2) 用于构建含氟杂环化合物, 扩展结构多样性库; 3) 在有机催化反应中作为底物或配体。其高纯度特性 ($\geq 96\%$) 确保其在精密合成中的可靠性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应密封防潮, 避免与强氧化剂或酸碱物质接触。使用前需恢复至室温以减少结露风险, 称量时建议在通风橱中进行。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间一致性严格把控。安全数据表明其具有刺激

性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入粉尘，需转移至空气新鲜处。废弃物处置应遵守当地化学品管理法规，避免环境释放。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件优化。更多技术参数请索取 COA 报告。